



## 转角双层石墨烯在应变下的光电导率

蔡潇潇 罗国语 李志强 贺言

### Optical conductivity of twisted bilayer graphene under heterostrain

Cai Xiao-Xiao Luo Guo-Yu Li Zhi-Qiang He Yan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 187301 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210110

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210110>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 扭转双层石墨烯物理性质、制备方法及其应用的研究进展

Review of fabrication methods, physical properties, and applications of twisted bilayer graphene

物理学报. 2018, 67(24): 246802 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181432>

#### 外延石墨烯电导率和费米速度随温度变化规律研究

Variations of the electrical conductivity and the Fermi velocity of epitaxial graphene with temperature

物理学报. 2017, 66(1): 014701 <https://doi.org/10.7498/aps.66.014701>

#### 从“魔角”石墨烯到摩尔超晶格量子模拟器

From magic angle twisted bilayer graphene to moiré superlattice quantum simulator

物理学报. 2021, 70(11): 118101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210476>

#### 转角石墨烯体系的拓扑特性和轨道磁性

Topological properties and orbital magnetism in twisted graphene systems

物理学报. 2020, 69(14): 147301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200506>

#### 双层石墨烯的化学气相沉积法制备及其光电器件

Synthesis of bilayer graphene via chemical vapor deposition and its optoelectronic devices

物理学报. 2017, 66(21): 218101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.218101>

#### 双层石墨烯层间限域CO氧化反应的密度泛函研究

Theoretical study of density functional of confined CO oxidation reaction between bilayer graphene

物理学报. 2019, 68(21): 218101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190447>

## 转角双层石墨烯在应变下的光电导率\*

蔡潇潇 罗国语 李志强 贺言†

(四川大学物理学院, 成都 610065)

(2021年1月16日收到; 2021年4月26日收到修改稿)

理论研究了转角双层石墨烯在施加不同单轴应变下的能带结构和光电导率, 用连续模型分别计算了转角为  $1.05^\circ$  和  $1.47^\circ$  的转角双层石墨烯在应变下的能带、态密度以及光电导率, 发现这些量随应变的变化是连续且显著的. 通过对能带的分析以及光电导率的测量能够获得应变对平带产生的实际影响, 这为今后实验对应变与平带的研究打下基础; 此外样品往往受到具有空间不均匀性的应变作用, 测量其局域的光电导率便能够估计应变的空间分布大小; 同时应变对能带的调制为原位调控转角双层石墨烯的强关联、拓扑以及量子效应提供了思路.

**关键词:** 转角双层石墨烯, 单轴应变, 光电导率

**PACS:** 73.21.Cd, 78.67.Wj, 73.22.Pr, 73.25.+i

**DOI:** 10.7498/aps.70.20210110

## 1 引言

转角双层石墨烯 (twisted bilayer graphene, TBG) 是由两层石墨烯以一定转角堆叠在一起的二维材料, 其转角带来的晶格失配使得表面形成莫尔条纹<sup>[1]</sup>, 这种莫尔周期性结构对 TBG 的电子能带结构有很大的影响, 其中最为重要的是在零能点附近形成两条莫尔能带. 当转角慢慢接近某些特定的角度 (魔角) 附近, 这两条能带逐渐变得平缓形成平带, 而在这样具有高态密度的平带中, 电子之间的相互作用变得不可忽略, 这使 TBG 成为研究电子强关联态和超导态的重要体系<sup>[2-4]</sup>. 不仅如此, 将公度堆叠的魔角 TBG 放在六方氮化硼 (hBN) 基底上, 由于彼此的晶格失配将破坏 TBG 面内的  $C_2$  对称性, 使狄拉克点打开能隙, 石墨烯每个谷被分开的两条平带将具有相反的陈数 ( $\pm 1$ )<sup>[5,6]</sup>; 实验发现在平带  $3/4$  填充时, 由于自旋极化效应 TBG 将表现出铁磁性<sup>[7]</sup>, 随后便在这一基础上发现了该体系中的量子反常霍尔效应<sup>[8]</sup>.

无论是对于 TBG 还是 TBG-hBN 体系, 平带

对于这些丰富物理现象的产生都是至关重要的. 除了用转角来调控平带, 应变也是一种重要的方法, 在样品的制备过程中, 应变的产生几乎是不可避免的, 比如基底带来的应变作用: 当对两层石墨烯施加不同的应变时, 其莫尔能带将会受到调制, 原本非魔角下的 TBG 在此应变下也能出现平带<sup>[9,10]</sup>; 同时, 应变不仅能够使材料能带拓扑数发生改变<sup>[10]</sup>, 也能够使晶格产生重构, 引发许多新奇的物理现象如孤子<sup>[11]</sup>、光子晶体<sup>[12]</sup>等; 应变相对于转角更易调控, 只需要具有压电性质的基底即可, 这使得原位调控范德瓦耳斯材料中的强关联、拓扑以及量子效应成为可能. 由此可见, 研究应变对于 TBG 的影响是在理论和实验上都非常有意义的.

本文研究应变对 TBG 这一重要体系的能带以及光电导率<sup>[13]</sup>的影响: 光电导率作为实验研究上的重要物理量, 不仅能够表征材料光学性质, 也能够一定程度上来揭示应变对于材料的电子能带结构的变化. 之前已有理论工作研究了 TBG 在应变作用下的能带结构<sup>[10]</sup>以及电子能谱<sup>[9,14]</sup>, 但是 TBG 在应变作用下的光电导率还有待研究. 有鉴于此, 本文利用连续模型<sup>[10,15-17]</sup>理论计算了转角

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11874271) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [heyancp@scu.edu.cn](mailto:heyancp@scu.edu.cn)

为  $1.05^\circ$  (魔角) 和  $1.47^\circ$  的 TBG 在其两层施加相反单轴应变时的能带结构、态密度以及低温下的光电导率: 在应变的作用下, TBG 的导带与价带的间隔增大, 同时伴随着范霍夫奇点的位置的移动; 另外, 导带和价带仍然由两个狄拉克点相连, 但是两个狄拉克点的位置发生了偏移, 在能量上不再简并, 这些变化都会对 TBG 的电子性质以及光学性质产生一定的影响. 本文首先简单介绍 TBG 在施加应变后的连续模型, 然后对 TBG 在应变下的能带、态密度以及低温下的光电导率进行讨论.

## 2 理论方法

图 1 展示了转角为  $5^\circ$  的 TBG 晶格结构, 其莫尔条纹周期清晰可见, 随着 TBG 的转角减小, 所形成的莫尔条纹周期将会远远大于晶格常数, 导致其不同谷之间的相互作用可以忽略, 这时可以用连续模型来计算 TBG 的能带结构. 由连续模型给出的 TBG 的哈密顿量形式为<sup>[10,15-17]</sup>

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{h}_1(\mathbf{k}) & \mathbf{T}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{T}^*(\mathbf{r}) & \mathbf{h}_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (1)$$

式中,  $\mathbf{h}_1(\mathbf{k})$ ,  $\mathbf{h}_2(\mathbf{k})$  分别为两层单层石墨烯自身的哈密顿量;  $\mathbf{T}(\mathbf{r})$  代表由莫尔超晶格引起的具有空间分布的层间隧穿<sup>[16]</sup>, 其表达式为

$$\mathbf{T}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} u & u' \\ u' & u'' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u & u'\omega^{-\xi} \\ u'\omega^\xi & u'' \end{pmatrix} e^{i\xi\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{r}} + \begin{pmatrix} u & u'\omega^\xi \\ u'\omega^{-\xi} & u'' \end{pmatrix} e^{i\xi(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2) \cdot \mathbf{r}}, \quad (2)$$

其中  $u$ ,  $u'$  和  $u''$  代表隧穿幅度, 在不考虑晶格重构的情况下  $u = u' = u''$ , 本文中其大小取  $110 \text{ meV}$ ,  $\omega = \exp\left(i\frac{2\pi}{3}\right)$ ,  $\mathbf{g}_1$  与  $\mathbf{g}_2$  分别表示莫尔超晶格的倒格矢,  $\xi = \pm 1$  分别代表石墨烯的两个能谷.

$$\mathbf{S} = \lambda \begin{pmatrix} -\cos(\varphi)^2 + v \sin(\varphi)^2 & (1+v) \cos(\varphi) \sin(\varphi) \\ (1+v) \cos(\varphi) \sin(\varphi) & -\sin(\varphi)^2 + v \cos(\varphi)^2 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

其中  $v = 0.16$  为石墨烯的泊松比.

利用连续模型得到的本征波函数再结合库伯公式可以计算出 TBG 的光电导率, 其形式为<sup>[18]</sup>

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{e^2 \hbar}{iS} \sum_{\alpha, \beta} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \frac{|\langle \alpha | v_x | \beta \rangle|^2}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + \hbar\omega + i\eta}, \quad (7)$$

其中, 积分取遍所有本征态,  $S$  代表积分区域面积,

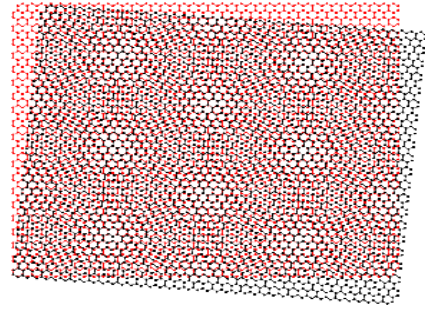


图 1 TBG 在转角为  $5^\circ$  时的结构示意图, 其莫尔周期结构清晰可见

Fig. 1. Schematic of TBG structure at  $\theta = 5^\circ$ , the resulted moiré pattern can be clearly seen.

由于应变和转角的作用, 单层石墨烯的哈密顿量  $h_l(\mathbf{k})$  的表达式变为<sup>[10]</sup>

$$h_l(\mathbf{k}) = \sum_{\xi=\pm} -\frac{\hbar v_F}{a} [(\mathbb{I} + \varepsilon_l^T)(\mathbf{k} - \mathbf{D}_{l,\xi})](\xi \sigma^x, \sigma^y). \quad (3)$$

式中,  $l = 1, 2$  代表第一、第二层石墨烯; 费米速度  $v_F = 10^6 \text{ m/s}$ , 由此得到  $\hbar v_F/a = 2.68 \text{ eV}$ ;  $\mathbb{I}$  为  $2 \times 2$  的单位矩阵;  $\varepsilon$  代表了应变与转角的作用项, 其表达式为

$$\varepsilon \cong \begin{pmatrix} \lambda_{xx} & \lambda_{xy} - \theta \\ \lambda_{xy} + \theta & \lambda_{yy} \end{pmatrix} = \mathbf{S}(\lambda) + \mathbf{\Theta}(\theta); \quad (4)$$

$\mathbf{D}_{l,\xi}$  为在应变和转角下的狄拉克费米子的位置<sup>[10]</sup>, 其形式为

$$\mathbf{D}_{l,\xi} = (\mathbb{I} - \varepsilon^T) \mathbf{K}_\xi - \frac{\sqrt{3}}{2a} \beta (\lambda_{xx} - \lambda_{yy}, -2\lambda_{xy}), \quad (5)$$

其中  $\mathbf{K}_\xi$  为无转角和应变下的石墨烯两个谷的位置,  $\beta = 3.14$  为跳跃因子.

这里考虑对两层石墨烯分别施加大小相同方向相反的单轴应变与转角, 即  $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1 = \frac{1}{2}\varepsilon$ , 单轴应变  $\mathbf{S}$  由幅度  $\lambda$  和方向  $\varphi$  决定, 其形式为<sup>[10]</sup>

$f(\varepsilon)$  为费米分布函数,  $\varepsilon_\alpha$  ( $\varepsilon_\beta$ ) 和  $|\alpha\rangle$  ( $|\beta\rangle$ ) 分别代表本征值和本征态,  $v_x = -(i/\hbar)[x, H]$  为速度算符,  $\eta$  取  $3 \text{ meV}$  代表展宽. 本文计算的所有光电导率值都是以单层石墨烯能带线性区域所贡献的光电导率值  $\sigma_{\text{mono}}$  为单位:

$$\sigma_{\text{mono}} = \frac{g_v g_s e^2}{16 \hbar}, \quad (8)$$

其中  $g_s$  和  $g_v$  分别为自旋与谷自由度, 其大小为 2.

有实验<sup>[14]</sup>表明 TBG 的单轴应变的幅度范围大小 0%—7%, 所以本文分别计算了当应变幅度  $\lambda$  为 0%, 0.3%, 0.6%, 应变方向  $\varphi$  为  $30^\circ$  时, 转角为  $1.05^\circ$  和  $1.47^\circ$  TBG 的能带以及光电导率.

### 3 理论结果与讨论

图 2(a) 展示了 TBG 在未考虑应变时的第一莫尔布里渊区示意图, 由于施加的应变幅度较小, 在应变下的第一莫尔布里渊区形状相比之前差别并不大. 我们沿着“ $K_1$ - $\Gamma$ - $K_2$ - $M_2$ - $\Gamma$ - $M_1$ - $K_1$ ”的路径绘制了转角为  $1.05^\circ$  和  $1.47^\circ$  时 TBG 在不同应变下的能带 (图 3). 可见在转角为  $1.05^\circ$  且未施加应变时, 零能附近形成了两条平带 (图 3(a)), 带宽约为 17 meV, 在施加应变后 (图 3(b) 和图 3(c)), 两条平带间隔增大, 变化量与施加的应变大小成正比; 其他位置处能带之间的间距也随着施加应变的增加而增大. 同样对于转角为  $1.47^\circ$  的能带 (图 3(d)—(f)), 除了本身未形成平带之外, 应变带来的影响与  $1.05^\circ$  时几乎相同. 值得一提的是, 对于魔角  $1.05^\circ$

的 TBG, 其莫尔能带在应变的作用下依然保持平带的特征, 这为平带的调控提供了额外的思路. 另外, 单轴应变的施加并未打破 TBG 的二重旋转与时间反演 ( $C_2\Gamma$ ) 对称性, 这使连接导带和价带的两个狄拉克点依然存在, 但 TBG 的面内镜面对称性受到破坏<sup>[19,20]</sup>, 狄拉克点的位置将发生偏移, 偏移的大小与施加的应变有关, 图 2(b) 展示了转角为  $1.05^\circ$ 、应变大小为 6% 时狄拉克点附近的能带, 所沿路径为图 2(a) 中的虚线, 此时狄拉克点位置由虚线路径中的黑点标注.

图 4 展示了转角为  $1.05^\circ$  的 TBG 在施加 0.6% 应变后的能带 (图 4(a))、态密度 (图 4(b)) 以及低温下的光电导率 (图 4(c)), 目的是为了分析能带、态密度与光电导率的对应关系. 态密度是单位能量中态的个数, 即能带越平, 态密度越大, 如图 4(a) 能带中的两个莫尔平带贡献了态密度 (图 4(b)) 中最大的两个范霍夫奇点, 其他能带的鞍点也对应于态密度的小峰值. 本文所计算的光电导率源于费米面附近的带内跃迁以及导带与价带的带间跃迁 (直接跃迁), 带内跃迁只主导零能附近的光电导率, 因此对光电导率其他非零处吸收峰的贡献均来自

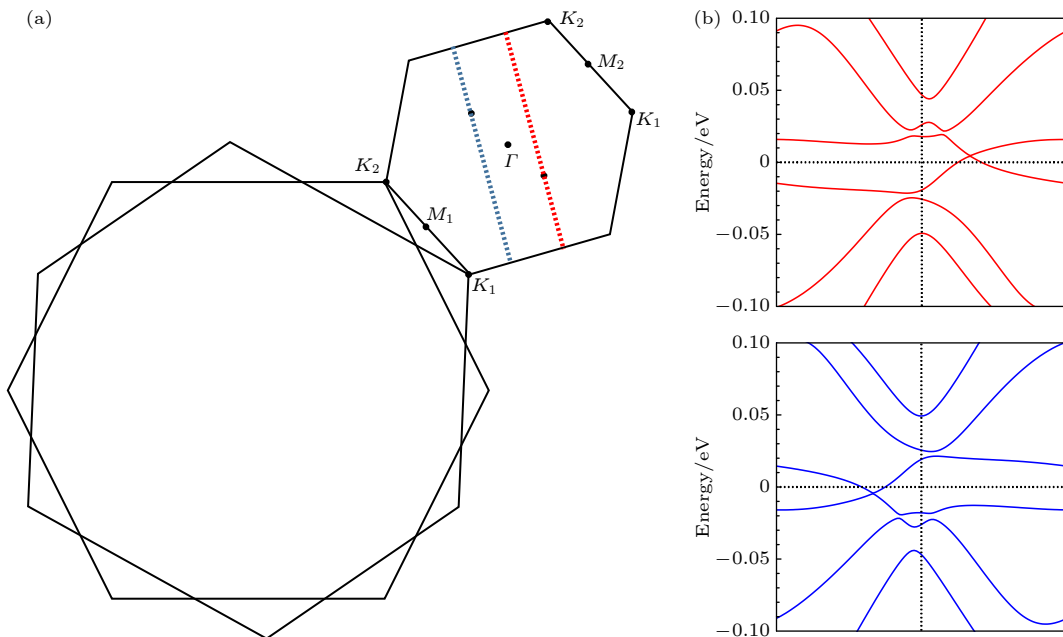


图 2 (a) TBG 莫尔布里渊区示意图: 两个大正六边形代表上下两层单层石墨烯的第一布里渊区, 小正六边形为转角形成的莫尔布里渊区; (b) 偏移后的狄拉克点附近能带: 红色和蓝色曲线分别代表图 (a) 中莫尔布里渊区同色虚线路径的能带, 虚线路径中的黑点代表狄拉克点的位置

Fig. 2. (a) Schematic of TBG moiré Brillouin zone: The two large regular hexagons represent the first Brillouin zone of the upper and lower graphene layers, the small regular hexagons refer to the moiré Brillouin zone. (b) The band structures near the shifted Dirac points: Red and blue curve lines represent the band structures follow the same colored dashed lines path in the panel (a) respectively, the Dirac points are marked by the black dots in dash lines.

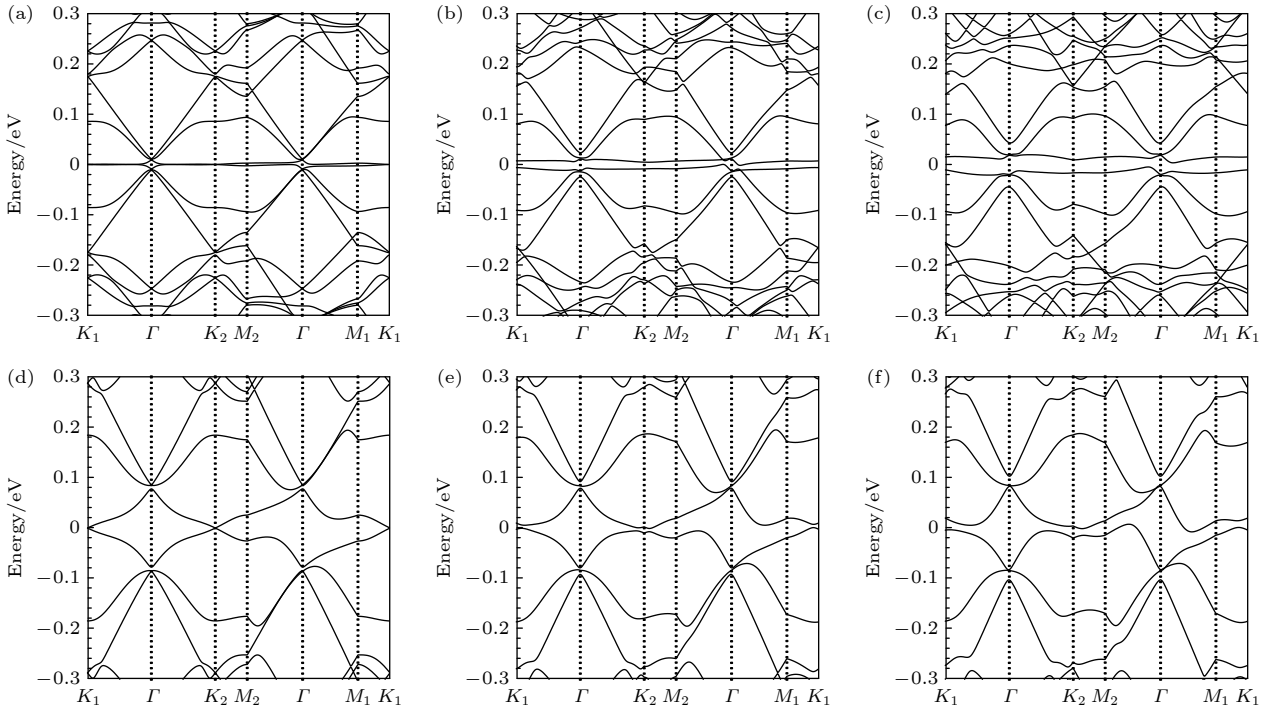


图3 TBG的能带 (a)—(c) TBG在转角为 $1.05^\circ$ ，应变大小分别为0%、3%和6%时的能带；(d)—(f) TBG在转角为 $1.47^\circ$ ，应变大小分别为0%、3%和6%时的能带

Fig. 3. Band structures of TBG: (a)–(c) The band structures with 0%, 0.3%, 0.6% uniaxial heterostrain at twisted angle  $\theta = 1.05^\circ$ , respectively; (d)–(f) the band structures with 0%, 0.3%, 0.6% uniaxial heterostrain of at twisted angle  $\theta = 1.47^\circ$ , respectively.

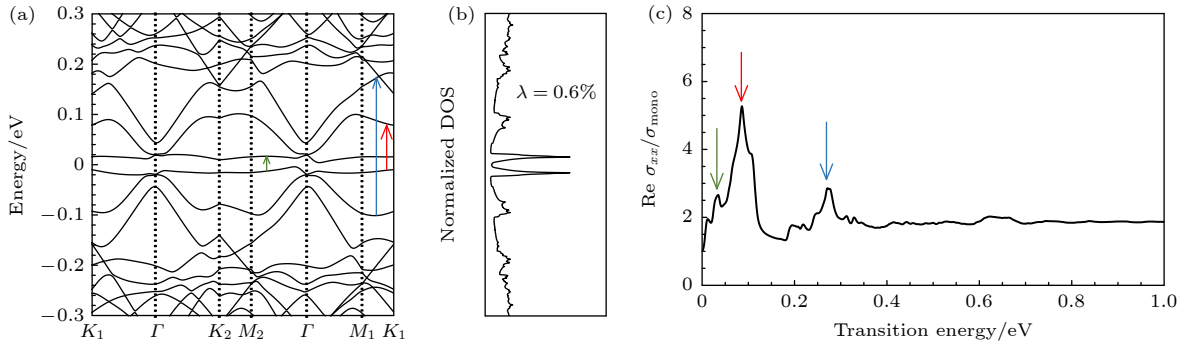


图4 TBG在转角为 $1.05^\circ$ 、施加0.6%大小的应变时的能带 (a)、态密度 (b) 以及光电导 (c)，图 (c) 中绿色、红色与蓝色箭头对应的吸收峰分别对应于图 (a) 中的同色箭头代表的带间跃迁

Fig. 4. (a) Band structure, (b) density of states and (c) corresponding optical conductivity of TBG with 0.6% uniaxial heterostrain at  $1.05^\circ$ . The green, red and blue arrows in panel (c) correspond to the interband transition marked with arrows of the same color in panel (a).

具有相同动量的两个态之间的带间跃迁，也就是说影响非零能处光电导率的因素有两个：1) 相同动量处基态与激发态的态密度；2) 跃迁概率。图4(c)用绿色、红色与蓝色箭头分别表示光电导率的3个主特征峰，对应于图4(a)中同色箭头所代表的带间跃迁，其他未标注的吸收峰同样也来自不同能带之间的带间跃迁：图4(c)中红色箭头表示的特征峰对应于莫尔价带对第一非莫尔导带之间的跃迁，贡献了光电导率中最大的峰值；蓝色箭头则对应跃

迁能量在 200 meV 之上最显著的吸收峰；绿色箭头表示的特征峰以及其附近的小峰均源于两个莫尔能带之间的跃迁，而这两个能带在相同动量处的态密度极大，却并未贡献出最大的吸收峰，这是因为两个莫尔能带之间的跃迁概率是很小的。特别地，当哈密顿量 ((1) 式) 具有电子空穴对称性时，价带与相对应的导带之间的带间跃迁概率为零 [18]，比如两个莫尔能带的  $M$  点之间并不能发生带间跃迁。

为了探究应变对于 TBG 光学性质的影响, 比较了 TBG 在不同应变下的态密度 (图 5) 以及光电导率实部 (图 6), 两个图中的曲线从下到上分别代表施加的应变幅度为 0%, 3%, 6%. 在两个转角下, 态密度极值峰的半高全宽随着应变的增大而逐渐增大 (图 5), 对应于能带带宽的增大, 同时也伴随着态密度峰值大小的减小——这些变化将使光学吸收峰变得扁平 (图 6). 从图 6 可见, TBG 光电导率的峰值集中在跃迁能量 600 meV 以内, 而在大于 600 meV 的区域, 光电导值约为 2 倍  $\sigma_{\text{mono}}$ . 转角为  $1.05^\circ$  时的主峰位于 86 meV 能量处,  $1.47^\circ$  时的主峰位于 188 meV 能量处, 在应变作用下, 这两个峰的能量位置变化不大, 峰型变得扁平. 其他位置的光电导率特征峰在施加应变后一部分发生合并, 一部分发生劈裂, 如图 6(a) 的①区域中原本处于能量 259 和 302 meV 处的两个峰在施加应变后合并成了在 270 meV 处的单峰 (在  $1.47^\circ$  时也有类似的现象), 这些变化均源于能带在应变下的改

变, 而从态密度中可以更加直观地展现这些变化: 峰的合并源于态密度在施加应变后峰型变得扁平, 如图 5(a) 的①区域, 该区域所代表的能带与第一非莫尔价带跃迁贡献出图 6(a) 中的特征峰值; 峰的劈裂在  $1.47^\circ$  时尤其突出, 如图 5(b) 中的②区域, 其态密度自下而上从未施加应变时的“尖锐边缘型”劈裂为施加应变后的“阶梯型”, 而由此区域能带与莫尔价带之间的跃迁贡献了图 6(b) 中的光电导率特征峰, 所以光电导率的特征峰也由“边缘型”转变为“阶梯型”. 对于  $1.05^\circ$  的 TBG, 原本未施加应变时零能处的单个范霍夫奇点在应变下产生劈裂 (图 5(a)), 莫尔能带在应变下分离 (图 3), 这种结果将导致电子的关联效应减弱, 不利于实验对电子强关联性质的研究; 而伴随着单个范霍夫奇点的劈裂,  $1.05^\circ$  下零能处的 Drude 峰 (图 6(a) 中黑色曲线的零点峰) 也一并消失, 此时光学吸收谱只包含带间跃迁的贡献, 这一效应在之前扫描隧道显微镜的实验<sup>[14]</sup>中得到证实.

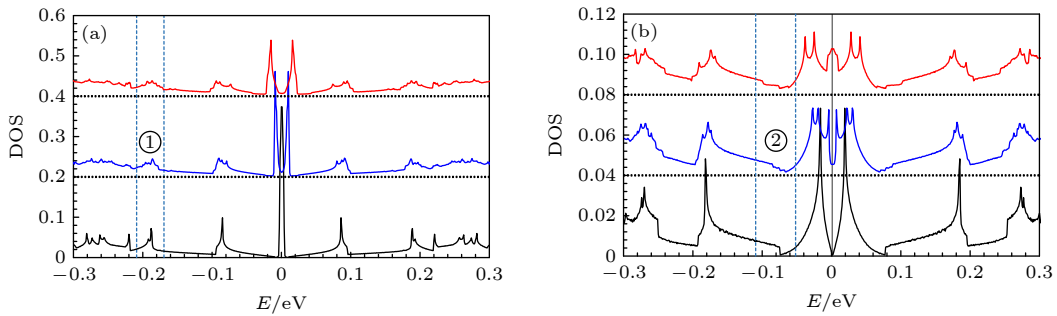


图 5 TBG 的态密度 (a) TBG 在转角为  $1.05^\circ$ , 应变大小分别为 0% (黑色), 0.3% (蓝色), 0.6% (红色) 时的态密度; (b) TBG 在转角为  $1.47^\circ$ , 应变大小分别为 0% (黑色), 0.3% (蓝色), 0.6% (红色) 时的态密度; 蓝色虚线表示正文中所讨论的①, ②区域的边界  
Fig. 5. (a) Density of states (DOS) of TBG with 0% (black curve), 0.3% (blue curve) and 0.6% (red curve) uniaxial heterostrain at  $1.05^\circ$ ; (b) DOS of TBG with 0% (black curve), 0.3% (blue curve) and 0.6% (red curve) uniaxial heterostrain at  $1.47^\circ$ . Blue dash lines in panel (a) and (b) represent the boundary of ①, ② region, respectively.

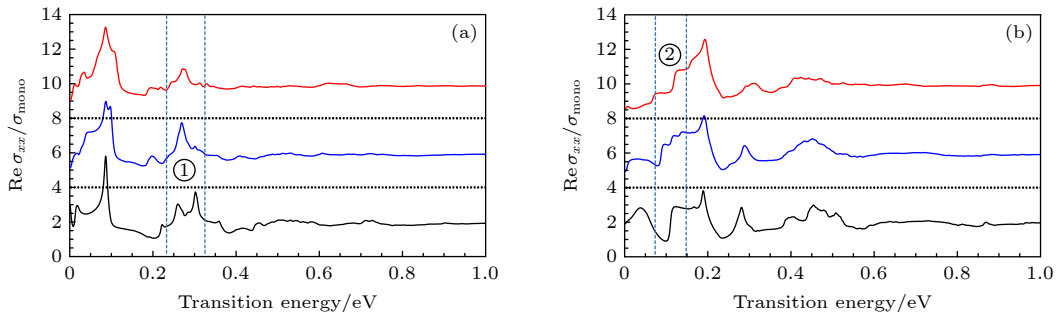


图 6 TBG 的光电导 (a) TBG 在转角为  $1.05^\circ$ , 应变大小分别为 0% (黑色), 0.3% (蓝色), 0.6% (红色) 时的光电导; (b) TBG 在转角为  $1.47^\circ$ , 应变大小分别为 0% (黑色), 0.3% (蓝色), 0.6% (红色) 时的光电导; 蓝色虚线表示正文中所讨论的①, ②区域的边界  
Fig. 6. (a) Optical conductivity of TBG with 0% (black curve), 0.3% (blue curve) and 0.6% (red curve) uniaxial heterostrain at  $1.05^\circ$ ; (b) optical conductivity of TBG with 0% (black curve), 0.3% (blue curve) and 0.6% (red curve) uniaxial heterostrain at  $1.47^\circ$ . Blue dash lines in panel (a) and (b) represent the boundary of ①, ② region, respectively.

由此可见, 施加一个比较大的应变对 TBG 的能带和光电导率均能产生较大的影响, 所以通过改变施加应变的大小便能够调控 TBG 的电子性质. 在实验上, TBG 样品往往受到具有空间不均匀性的应变作用, 而本文的结果表明测量 TBG 局域的光电导率就可以估计其局域的应变大小, 从而得到应变的空间分布.

## 4 总 结

本文用连续模型从理论上研究了转角为  $1.05^\circ$  和  $1.47^\circ$  的 TBG 光电导率在施加不同大小的单轴应变下所产生的变化. 可见在两个转角下电导率谱主要由 600 meV 以下的几个特征峰表征, 这些特征峰与态密度中的一些范霍夫奇点能量位置之差相对应. 随着应变的逐渐施加, 能带与电导率谱也发生几乎连续的变化, 而这些变化是比较明显的. 也就是说, 在实验上若不考虑应变对于 TBG 的影响将会使理论结果与实际偏离. 对于魔角 TBG, 应变使得平带带宽增大, 这不利于研究强关联效应, 所以实验在对于魔角 TBG 系统中强关联态进行研究时应尽量减小应变; 而对于非魔角处的石墨烯, 应变的施加也可以使其形成平带<sup>[9,10]</sup>. 这表明通过原位改变应变大小来调控 TBG 电子的强关联效应是可行的. 本文的理论结果也为用局域光电导率确定 TBG 的空间应变大小分布提供了参考.

## 参考文献

[1] Lu X B, Zhang G Y 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 077305 (in

- Chinese) [卢晓波, 张广宇 2015 *物理学报* **64** 077305]
- [2] Cao Y, Fatemi V, Demir A, Fang S, Tomarken S L, Luo J Y, Sanchez-Yamagishi J D, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E 2018 *Nature* **556** 80
- [3] Cao Y, Fatemi V, Fang S, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 43
- [4] Xia L, Kennes D M, Tancogne-Dejean N, Altarelli M, Rubio A 2019 *Nano Lett.* **19** 4934
- [5] Zhang Y H, Mao D, Cao Y, Jarillo-Herrero P, Senthil T 2019 *Phys. Rev. B* **99** 075127
- [6] Zhang Y H, Mao M, Senthil T 2019 *Phys. Rev. Research* **1** 033126
- [7] Sharpe A L, Fox E J, Barnard A W, Finney J, Watanabe K, Taniguchi T, Kastner M A, Goldhaber-Gordon D 2019 *Science* **365** 605
- [8] Serlin M, Tschirhart C L, Polshyn H, Zhang Y, Zhu J, Watanabe K, Taniguchi T, Balents L, Young A F 2020 *Science* **367** 900
- [9] Huder L, Artaud A, Quang T L, Laissardière G T D, Jansen A G M, Lapertot G, Chapelier C, Renard V T 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 156405
- [10] Bi Z, Yuan N F Q, Fu L 2019 *Phys. Rev. B* **100** 035448
- [11] Alden J S, Tsen A W, Huang P Y, Hovden R, Brown L, Park J, Muller D A, McEuen P L 2013 *PNAS* **110** 11256
- [12] Sunku S S, Ni G X, Jiang B Y, Yoo H, Sternbach A, McLeod A S, Stauber T, Xiong L, Taniguchi T, Watanabe K, Kim P, M. Fogler M M, Basov D N 2018 *Science* **362** 1153
- [13] Wen L, Li Z Q, He Y 2021 *Chin. Phys. B* **30** 017303
- [14] Kerelsky A, McGilly L, Kennes D M, Xian L, Yankowitz M, Chen S, Watanabe K, Taniguchi T, Hone J, Dean C 2019 *Nature* **572** 95
- [15] Lopes dos Santos J M B, Peres N M R, Castro Neto A H 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 256802
- [16] Koshino M, Yuan N F Q, Koretsune T, Ochi M, Kuroki K, Fu L 2018 *Phys. Rev. X* **8** 031087
- [17] McCann E, Koshino M 2013 *Rep. Prog. Phys.* **76** 056503
- [18] Moon P, Koshino M 2013 *Phys. Rev. B* **87** 205404
- [19] Po H C, Zou L J, Vishwanath A, Senthil T 2018 *Phys. Rev. X* **8** 031089
- [20] Lü X Y, Li Z Q 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 220303 (in Chinese) [吕新宇, 李志强 2019 *物理学报* **68** 220303]

# Optical conductivity of twisted bilayer graphene under heterostrain<sup>\*</sup>

Cai Xiao-Xiao    Luo Guo-Yu    Li Zhi-Qiang    He Yan<sup>†</sup>

(*College of Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China*)

( Received 16 January 2021; revised manuscript received 26 April 2021 )

## Abstract

Twisted bilayer graphene (TBG) is a two-dimensional material composed of two layers stacked at a certain angle. When the twisted angle decreases, the lattice mismatch between two layers produces moiré pattern at a long wavelength which significantly modifies the low-energy band structure. In particular, when the twisted angle is close to the so-called “magic angle”, two moiré flat bands are formed near a charge neutral point due to the strong interlayer coupling. These flat bands with high density of states are essential in realizing superconductivity and correlated insulating states. More recently, the magic angle TBG combining an hBN system has exhibited spin-valley polarization when 3/4 of flat bands are filled, thereby providing an ideal platform to achieve quantum anomalous Hall states. Whether it is TBG system or TBG-hBN system, the flat band becomes a crucial condition for discovering so rich physical connotations. Besides the twisted angle, the strain gives an alternative way to modulate flat bands. It has been reported that applying heterostrain in magic angle TBG can makes flat moiré band tunable; strain can also generate flat bands in non-magic angle TBG. Moreover, the reconstruction of TBG due to the strain gives rise to a serial of novel physical phenomena such as topological protected soliton and photonic crystal. Another reason for studying strain effect is that the strain is ubiquitous in the fabrication progress. The strain can also be controlled via piezoelectric substrate which makes possible the in situ modulation of correlated states, topology and quantum effect.

Our work is to study the heterostrain effect in TBG band structure and optical conductivity by using a continuum model. Although the resulting conduction band and valence bands keep connected through Dirac points protected by the  $C_2$  symmetry, their separation increases significantly when heterostrain is applied while the Dirac point is also shifted. The optical conductivity is characterized by a series of peaks associated with van Hove singularities, and the peak energies are systematically shifted with the strain amplitude. These changes show that the heterostrain exerts a great influence on electron property of TBG.

**Keywords:** twisted bilayer graphene, heterostrain, optical conductivity

**PACS:** 73.21.Cd, 78.67.Wj, 73.22.Pr, 73.25.+i

**DOI:** [10.7498/aps.70.20210110](https://doi.org/10.7498/aps.70.20210110)

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11874271).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [heyang\\_ctp@scu.edu.cn](mailto:heyang_ctp@scu.edu.cn)